

## Q27a 第一原理計算による星間氷表面への原子の吸着エネルギーの推定 1 : 量子化学計算による系統的予測

中谷直輝 (首都大学東京), 下西隆 (東北大学), 古家健次 (筑波大学), 羽馬哲也 (北海道大学)

星間分子雲において星間ダストや氷によって触媒される化学反応は、星形成初期における多原子分子の生成や、宇宙空間における分子の組成を決める重要な要素である。10K から 20K の極低温下で行われるこうした化学反応は、数万年から数百万年をかけてゆっくりと進行するため、地上実験での追跡はほぼ不可能であり、計算化学的アプローチによるシミュレーションがその微視的メカニズムを解明する上で強力なツールとなり得る。星間ダスト上での化学進化過程を考える上で、ダストや氷表面への原子・分子の吸着エネルギーと表面拡散エネルギーは重要な因子となることが知られているが、従来の計算研究では、氷への物理吸着を前提とした経験的な値が利用されてきた。また計算手法についても、古典力学に基づく分子動力学シミュレーションや反応速度論に基づく組成比シミュレーションがそのほとんどであり、化学反応そのものを取り扱った研究は数える程しかない。

本研究では、化学反応を取り扱うことが可能な量子化学計算に基づいて、第一原理的に原子の吸着エネルギーを予測し、その結果に基づいて組成比シミュレーションを行うことで、星間ダスト上の化学進化を系統的に解明することを目的として研究を行った。本手法を用いて C、N、O 原子の吸着エネルギーを計算した結果、C 原子が氷表面へ化学吸着すること、N 原子は純粋に物理吸着するため比較的吸着エネルギーが小さいことが明らかとなり、特に C 原子の計算結果は、水の O 原子と化学結合を形成しており、メタノールやホルムアルデヒドなどの CO 化学種への化学進化過程の新たな可能性を示唆するものである。得られた結果を利用した行った組成比シミュレーションについては下西らにより報告される。